Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U001876

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-06-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коновалова Ірина Сергіївна
2. Konovalova Iryna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 01-06-2018

Спеціальність за освітою: Хімічна технологія органічних речовин

Місце роботи здобувача: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Особливості молекулярної та кристалічної будови діамінопохідних ароматичних та гетероароматичних сполук

2. Peculiarities of the molecular and crystal structure of diamino derivatives of aromatic and heteroaromatic compounds

Реферат/анотація:

1. Експериментальними та квантово-хімічними методами проведено систематичне вивчення геометричних характеристик аміногруп, що є замісниками в ароматичному циклі, та факторів, що на них впливають. Прецизійні рентгеноструктурні дослідження 3,4-діаміно-1,2,4-триазолу і його 5-метилильної похідної та аналіз розподілу електронної густини за даними квантової хімії показали, що геометричні характеристики аміногруп залежать від природи атома, з яким аміногрупа зв'язана, від ступеня спряження неподіленої електронної пари Нітрогену з л-системою ароматичного циклу, та від впливу полярного середовища, що підсилює спряження. Посилення спряження аміногрупи з ароматичною системою приводить до ослаблення її акцепторних властивостей у водневому зв'язуванні. При детальному аналізі характеристик водневих зв'язків в модельній системі піридин-вода було охарактеризовано новий вид водневого зв'язку змішаного

типу X-H...N'/X-H...л', в якому одночасно і неподілена електронна пара Нітрогену і л-система циклу є акцептором протонів. Для модельних молекул моно- та діамінобензенів було виявлено, що роль водневих зв'язків N-H...N' у формуванні кристалічної структури залежить від кількості і взаємного розташування аміногруп в циклі (орто, мета або пара). Найбільшу роль водневий зв'язок N-H...N' має в кристалі орто-діамінобензена, утворюючи будівельний блок кристалічної упаковки і базовий структурний мотив. В кристалах мета-діамінобензена вплив N-H...N' водневого зв'язку на формування упаковки порівняний з впливом водневого зв'язку N-H...л'. Наявність тільки однієї аміногрупи або двох аміногруп в максимально віддалених положеннях обумовлює дуже незначну роль водневих зв'язків N-H...N' в організації кристалів. В кристалах нітрозаміщених похідних діамінобензенів було виявлено, що пара- або орто-положення аміногрупи відносно нітрогрупи зумовлює значне зменшення акцепторних властивостей аміногрупи внаслідок пуш-пульного ефекту або внутрішньомолекулярного водневого зв'язування. При цьому роль водневих зв'язків N-H...N' в організації кристалів стає зовсім незначною. Аналіз міжмолекулярних взаємодій показав, що саме слабкі водневі зв'язки X-H...N', за участю аміногрупи як акцептора протонів, впливають на утворення поліморфних модифікацій діамінотриазолу, аніліну та орто-діамінобензолу.

2. Experimental and quantum-chemical methods have systematically studied the geometric characteristics of amino groups and factors affecting them. Results have shown that that the geometric characteristics of amino groups depend on the nature of the atom with which the amino group is connected, from the degree of conjugation of the lone electron pair of nitrogen with the л-system of the aromatic cycle and from the influence of the polar environment, which amplifies the conjugation. For model molecules of mono and diaminobenzenes, it was discovered that the role of hydrogen bonds N-H...N' in the formation of the crystalline structure depends on the number and relative position of the amino groups in the ring (ortho, meta or para). The hydrogen bond N-H...N' plays a major role in the ortho-diaminobenzene crystal, forming a building block of crystal packing and a basic structural motive. In crystals of nitro substituted diaminobenzene derivatives, it has been found that the para- or ortho- positions of the amino group relative to the nitro group results in a significant decrease in the acceptor properties of the amino group as a result of the push-pull effect or intramolecular hydrogen bundle. At the same time, the role of the hydrogen bonds N-H...N' in the organization of crystals becomes quite insignificant. An analysis of intermolecular interactions has shown that the weak hydrogen bonds X-H...N', with the participation of the amino group as an acceptor of proton, influence the formation of polymorphic modifications of diaminotriazole, aniline and ortho-diaminobenzene.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шишкін Олег Валерійович

2. Shishkin Oleh

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коваленко Сергій Миколайович

2. Kovalenko Serhii

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Оковитий Сергій Іванович

2. Okovyty Serhii

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.